

Gaetano Calogero

Curriculum Vitae

Informazioni personali

Data e luogo
di nascita

Posizione attuale

Da Marzo 2020 **Assegno di ricerca**, presso Dipartimento di Ingegneria dell'Informazione, Università degli Studi di Pisa, Via G. Caruso 16, 56122 Pisa (PI).

- Attività di ricerca: "Modellizzazione ab-initio e multiscala di dispositivi elettronici basati su eterostrutture di materiali bidimensionali" - s.s.d. ING-INF/01 - Elettronica

Titoli di studio

13 Mar 2019 **Dottorato di Ricerca (PhD)**, Technical University of Denmark (DTU Nanotech), Copenhagen, Danimarca.

- Affiliazione al Center for Nanostructured Graphene (CNG)
- Titolo della tesi: "*Multi-scale atomistic simulations of graphene-based nanodevices*", disponibile su: <https://orbit.dtu.dk/en/publications/multi-scale-atomistic-simulations-of-graphene-based-nanodevice>.

29 Ott 2015 **Laurea Magistrale in Fisica, indirizzo Fisica della Materia**, Università degli Studi di Catania, Dipartimento di Fisica e Astronomia "Ettore Majorana", Italia.

- Voto di laurea: 110/110 e lode
- Titolo della tesi: "*A Van der Waals density functional study of nitrogen-doped graphene on Ir(111) for chemical identification of individual atoms with STM and AFM*", disponibile su: https://www.researchgate.net/profile/Gaetano_Calogero.
- Registrato al n. 108029/inf.

28 Nov 2013 **Laurea Triennale in Fisica**, Università degli Studi di Catania, Dipartimento di Fisica e Astronomia "Ettore Majorana", Italia.

- Voto di laurea: 110/110 e lode
- Tesi supervisionata da Dott. A. La Magna e Dott. I. Deretzis, CNR-IMM (Catania)
- Titolo della tesi: "*Unfolding di strutture a bande su super-reticolo*", disponibile su: https://www.researchgate.net/profile/Gaetano_Calogero.
- Registrato al n. 95184/inf.

Lug 2010 **Diploma di Maturità scientifica (100/100)**, Liceo Scientifico Statale "Principe Umberto di Savoia", Catania, Italia.

- Voto: 100/100

Esperienze professionali

Mar 2019 - Mar 2020 **Assegno di Ricerca**, presso Dipartimento di Ingegneria dell'Informazione, Università degli Studi di Pisa, Pisa (PI).

- Attività di ricerca: "Modellizzazione multiscala di dispositivi nanoelettronici e sviluppo di metodi computazionali di simulazione" - s.s.d ING-INF/01 - Elettronica

- Dic 2018 - **Research Assistant**, presso Technical University of Denmark (DTU Physics), Copenhagen,
Feb 2019 Danimarca.
- Mar 2018 - Soggiorno durante dottorato per collaborazione con Prof Thomas Frederiksen e Prof
Mag 2018 Aran Garcia-Lekue presso **DIPC** (Donostia International Physics Center, San Sebastian, Spagna), su progetto: "Electron injection and far-field propagation in bottom-up synthesized nanoporous graphene"
- Set 2017 - Soggiorno durante dottorato per collaborazione con Prof Giuseppe G.N. Angilella presso
Nov 2017 **Università di Catania** (Catania, Italia), su progetto: "Advanced numerical methods for solving the Poisson equation in the frequency-dependent non-equilibrium Green's function framework"
- Oct 2016 - Soggiorno durante dottorato per collaborazione con Dott Nick R. Papior e Prof Pablo
Dic 2016 Ordejon presso **ICN2** (Catalan Institute of Nanoscience and Nanotechnology, Barcelona, Spagna), su progetto "Large-scale tight binding simulations of ballistic transport in a two-dimensional Dirac fermion microscope"
- Mar 2015 - Soggiorno "Erasmus Plus traineeship" per collaborazione con Prof Ingmar Swart e Prof
Ago 2015 Marijn van Huis presso **Utrecht Universiteit** (Utrecht, Olanda), su progetto di tesi di Laurea Magistrale "DFT study of nitrogen-doped graphene on Ir(111) for chemical identification of individual atoms with STM and AFM".

Maggiori collaborazioni

- Prof Giuseppe Iannaccone - Università di Pisa (Pisa, Italia)
- Prof Gianluca Fiori - Università di Pisa (Pisa, Italia)
- Prof Mads Brandbyge - DTU Nanotech (Copenhagen, Danimarca)
- Dott Antonino La Magna - CNR-IMM (Catania, Italia)
- Prof Peter Bøggild - DTU Nanotech (Copenhagen, Danimarca)
- Dott Nick R. Papior - DTU Nanotech (Copenhagen, Danimarca)
- Prof Antti-Pekka Jauho - DTU Nanotech (Copenhagen, Danimarca)
- Prof Thomas Frederiksen - DIPC (San Sebastian, Spagna)
- Prof Aran Garcia-Lekue - (San Sebastian, Spagna)
- Prof Ingmar Swart - Utrecht University (Utrecht, Olanda)
- Prof Marijn van Huis - Utrecht University (Utrecht, Olanda)
- Prof Giuseppe G.N. Angilella - Università di Catania (Catania, Italia)

Abilità personali e competenze

Comunicative

Italiano Madre lingua

Common European Framework of Reference for Languages (CEFR)
Levels: A1/2: Basic user - B1/2: Independent user - C1/2 Proficient user

		Comprehension		Speaking		Writing
		Listening	Reading	Interaction	Production	
Inglese	Ottima	C1	C1	C1	C1	C1

(ESOL First Certificate, Level B2, British Institutes, May 2009)

Informatiche

Linguaggi Python, C, Bash, Fortran (basic)
Sistemi GNU/Linux, Mac OS X, Windows
operativi

Software di simulazione SIESTA, TRANSIESTA, TBTRANS, VASP, SYNOPSIS QUANTUMATK, QUANTUM ESPRESSO, WANNIER90, NANOTCAD VIDES

Altro SISL, \LaTeX , Mathematica, Visual Molecular Dynamics (VMD), MS Office, JMOL, KWANT, ABINIT, TRIQS, Github, Lyx, VESTA, p4vasp, XcrysDen, COMSOL Multiphysics, Matlab, Gimp, Photoshop

Attività organizzative

- Membro del comitato organizzativo locale della conferenza “CEF 2020 - Cool Electrons In Flatland” (15-24 Giugno 2020, Catania, Italy)
- Stesura di documenti per progetto europeo “QUEFORMAL” (Horizon 2020 Framework Program, Future Emerging Technologies, n. 829035)
- Co-tutor presso workshop “Multi-electrode nanoscale transport with non-equilibrium Greens functions: From tight-binding to DFT” tenutosi alla DTU, Copenhagen, Danimarca (20-23 Novembre 2018)
- Co-tutor presso workshop “Multi-electrode nanoscale transport with non-equilibrium Greens functions: From tight-binding to DFT” tenutosi alla DTU, Copenhagen, Danimarca (25-27 Ottobre 2017)
- Co-tutor presso workshop “TBtrans and TranSiesta tutorial: non-equilibrium Green function, from tight-binding to self-consistency” tenutosi al ICN2, Barcelona, Spagna (9-11 Novembre 2016)

Attività di supervisione

- Studente di Dottorato L. Lucchesi, Università di Pisa (w/ G. Iannaccone)
- Studente di Dottorato G. Lovarelli, Università di Pisa (w/ G. Iannaccone)
- Studente di Dottorato A. Mariani, Università di Pisa (w/ G. Iannaccone)
- Studente di Dottorato F. Mazziotti, Università di Pisa (w/ G. Iannaccone)
- Tesi di Laurea Magistrale di A. Impellizzeri, a.a. 2016-2017, Università di Catania & DTU Nanotech (w/ G.G.N. Angilella, M. Brandbyge, T. Gunst)

Attività di insegnamento

2017-2018 Assistente al corso “Quantum mechanical modeling of nanoelectronics”, MSc/PhD (Technical University of Denmark)

Mar 2017 Assistente al corso “Micro 1: Solid-state Electronics & Microtechnology”, BSc (Technical University of Denmark)

Pubblicazioni in riviste internazionali

- G. Calogero, D. Marian, E.G. Marin, G. Fiori and G. Iannaccone, “*Field-Effect Transistors Based On Lateral Heterostructures Of Mono-Multilayer PtSe₂: A Simulation Study With Ab-initio Interface Modelling*”, submitted
- A. Mariani, G. Calogero, Z. Golsanamlou, A. Fortunelli, G. Fiori and G. Iannaccone, “*Lateral heterostructures of Transition Metal Dichalcogenides for Field-Effect Transistors: an exploration study through multi-scale simulations*”, in preparation
- L. Lucchesi, G. Calogero, G. Fiori and G. Iannaccone, “*Two-dimensional Lateral Heterostructure Ballistic Bipolar Junction Transistor*”, in preparation
- G. Lovarelli, G. Calogero, G. Fiori and G. Iannaccone, “*Efficient multi-scale modelling of vertical stacks of 2D materials for floating gate memory devices*”, in preparation
- I. Alcón, G. Calogero, N. Papior and M. Brandbyge, in preparation
- N. Papior, G. Calogero, S. Leitherer and M. Brandbyge “*Removing all periodic boundary*

- conditions: Efficient nonequilibrium Green's function calculations*", Physical Review B **100**, 195417 (2019)
- G. Calogero, I. Alcón, N. Papior, A.P. Jauho and M. Brandbyge "*Quantum Interference Engineering of Nanoporous Graphene for Carbon Nanocircuitry*", Journal of the American Chemical Society **141** (33), 13081-13088 (2019)
 - G. Calogero, N. Papior, M. Koleini, M.H.L. Larsen and M. Brandbyge "*Multi-scale approach to first-principles electron transport beyond 100 nm*", Nanoscale **11**, 6153-6164 (2019)
 - G. Calogero, N. Papior, B. Kretz, A. Garcia-Lekue, T. Frederiksen and M. Brandbyge "*Electron Transport in Nanoporous Graphene: Probing the Talbot Effect*", Nano Letters **19** (1), 576-581 (2019)
 - J.M. Caridad, G. Calogero, P. Pedrinazzi, J. Santos, A. Impellizzeri, T. Gunst, T. Booth, R. Sordan, P. Bøggild and M. Brandbyge "*A graphene-edge ferroelectric molecular switch*", Nano Letters **18**, 4675–4683 (2018)
 - G. Calogero, N. Papior, P. Bøggild and M. Brandbyge "*Large-scale tight-binding simulations of quantum transport in ballistic graphene*", Journal of Physics: Condensed Matter **30**, 364001 (2018)
 - N. Papior, G. Calogero and M. Brandbyge "*Simple and efficient LCAO basis sets for the diffuse states in carbon nanostructures*", Journal of Physics: Condensed Matter **30**, 25LT01 (2018)
 - P. Bøggild, J.M. Caridad, C. Stampfer, G. Calogero, N. Papior and M. Brandbyge, "*A Two-dimensional Dirac fermion microscope*", Nature Communications **8**, 15783 (2017)
 - N.J. van der Heijden, D. Smith, G. Calogero, R.S. Koster, M.A. van Huis and I. Swart, "*Recognizing nitrogen dopant atoms in graphene using atomic force microscopy*", Physical Review B **93**, 245430 (2016)
 - I. Deretzis, G. Calogero, G.G.N. Angilella and A. La Magna, "*Role of basis sets on the unfolding of supercell band structures: From tight-binding to density functional theory*", Europhysics Letters **107**, 27006 (2014)

Contributi a Conferenze e Workshop internazionali

- Invited talk alla conferenza "CEF 2020 - Cool Electrons In Flatland" (June 15-24, 2020 - Catania, Italy)
- Invited talk and hands-on al workshop "Advanced school on Quantum Transport using SIESTA" (date to be defined, 2020 - DIPC, San Sebastian, Spain)
- Talk: "*Electron transport in nano-porous graphene: from Talbot interference to quantum confinement*" alla conferenza **Graphene 2019** (June 25-28, 2019 - Rome, Italy)
- Talk: "*Atomistic far-field currents in graphene - how to include DFT-precision regions in large-scale tight-binding*" alla conferenza **TNT 2018** - Trends in NanoTechnology (September 3-7, 2018 - Lecce, Italy)
- Poster: "*Atomistic far-field currents in graphene using DFT-precision regions - how to couple DFT and large-scale tight-binding*" alla conferenza **Graphene 2018** (June 26-29, 2018 - Dresden, Germany)
- Poster: "*Atomistic large-scale simulations of transport in ballistic graphene*" alla conferenza **ImagineNano 2018** (March 13-15, 2018 - Bilbao, Spain)
- Invited talk: "*Switching and monitoring polar molecules at graphene edges*" presso workshop del Center for Nanostructured Graphene (November 8, 2017 - Copenhagen, Denmark)
- Invited talk: "*Quantum transport simulations of a 2D Dirac Fermion Microscope*" presso workshop del Center for Nanostructured Graphene (June 7, 2017 - Copenhagen,

Denmark)

- Poster: *"Atomistic large-scale simulations of transport in ballistic graphene"* alla conferenza **Carbonhagen 2017** (August 16-17, 2017 - Copenhagen, Denmark)
- Poster: *"The influence of the substrate on chemical identification of dopant atoms in graphene with AFM"* alla conferenza **CAMD 2016** - Summer School on Electronic Structure Theory and Materials Design (August 14-19, 2016 - Copenhagen, Denmark)
- Poster: *"The influence of the substrate on chemical identification of dopant atoms in graphene with AFM"* alla scuola **ISSCQM 2016** - International Summer School on Computational Quantum Materials (June 1-10, 2016 - Sherbrooke, Canada)
- Poster: *"The influence of the substrate on chemical identification of dopant atoms in graphene with AFM"* alla conferenza **Graphene 2016** (April 19-22, 2016 - Genova, Italy)
- Talk: *"Electronic structure and quantum transport in disordered graphene"* alla conferenza **ECMI 2014** - European Consortium for Mathematics in Industry (June 9-13, 2014 - Taormina, Italy)

Premi

- **Best poster presentation** alla conferenza "Graphene 2018" (Dresden, Germany)
- **Best poster presentation** alla conferenza "Carbonhagen 2017" (Copenhagen, Denmark)